

## Асимметричность плотности распределения объемного некомпенсированного заряда на границе металлургического p-n перехода

А.С. Мазин<sup>1,2</sup>, А.И. Шевченко<sup>1</sup>, М.А.Быков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, просп. академика Вернадского, 4, Симферополь 95007, Крым, Украина

<sup>2</sup> Крымский научный центр НАН и МОН, просп. академика Вернадского, 2, Симферополь 95007, Крым, Украина

(Получено 31.08.2012; опубликована online 07.11.2012)

В работе рассмотрены особенности формирования мелкозалегающего перехода и его расчета для создания фотогальванического элемента на основе монокристаллического кремния с фронтальным легированным бором. Показана неоднозначность расчетных профилей перекомпенсирующей примеси, которая зависит от точности определения констант диффузионных уравнений.

**Ключевые слова:** Мелкозалегающий p-n переход, Профиль легирования кристалла, Коэффициент диффузии, Энергия активации диффузии, Плотность распределения заряда, Некомпенсированный заряд p-n перехода.

PACS numbers: 71.22.i, 71.23.An

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Формирование потенциальных барьеров полупроводниковых приборов посредством диффузионных процессов является одним из основных приемов современной микроэлектронной промышленности. Однако многовекторность процессов диффузии и зависимость определения его параметров от множества внешних условий требует более глубокого анализа.

Расхождение коэффициентов преобразования идеальных и реальных фотоэлектрических преобразователей во многом определяется точностью построения тянущего поля перехода, образованного объемным некомпенсированным зарядом. Исходя именно из этих предпосылок, нами предпринята попытка проанализировать влияние отклонения условий проведения технологических циклов и исходных параметров в расчетных зависимостях на точность определения профиля распределения примесных атомов, плотности распределения заряда и геометрии некомпенсированного заряда p-n перехода.

### 2. ФОРМИРОВАНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА

Специфика построения фотопреобразующих полупроводниковых структур диктует условия получения мелкозалегающего перехода глубиной в десятки доли микрона, при этом точность построения подобного прибора лежит на уровне десятков - сотен нанометров. В этом случае максимальное токособирание фотогенерированных носителей требует построение потенциального барьера с наименьшим градиентом для обеспечения протяженности области объемного заряда.

С другой стороны, условие широкомасштабного промышленного производства с низкой себестоимостью ватта готового фотоэлектрического преобразователя требуют работы по более упрощенной технологической схеме с как можно меньшими температурами диффузии, лежащие на уровне 700-850 °C [1].

Выбор оптимальных режимов технологических процессов создания тянущего поля в промышленных условиях диктует, с одной стороны, достаточно точ-

ных модельных подходов для определения глубины залегания p-n перехода, области объемного заряда, [2] и достаточно быстрых и упрощенных расчетов, с другой стороны.

Столь противоречивые требования вынуждают проводить расчеты исходя из среднестатистических констант процесса диффузии. А расчет напряженности поля и потенциала, при этом, практически не задействуется.

Быстрые аналитические методы опираются на средние статистические или подгоночные параметры, определяемые конкретным промышленным оборудованием и конкретными химическими составляющими. Численные методы, напротив громоздки, перегружены большим количественным расчетом элементарных процессов. Опираясь на «среднеарифметическое» двух методик, нами предпринята попытка оценки точности определения потенциального барьера и напряженности поля при упрощенном численно-аналитическом расчете. При этом были проанализированы точности измерения и расчета физических констант для детерминирования процесса диффузии фосфора в кристаллический кремний.

Само определение коэффициента диффузии в кристалле является неоднозначной задачей и, имея сложную интегральную зависимость [3, 4] от концентрации, зависит как от внешних условий проведения процесса, так и от состояния самого кристалла. Две основные константы упрощенной модели [5, 6] позволяют относительно точно описать температурное изменение коэффициента диффузии. Однако основным остается определение этих констант для конкретных технологических условий. Неточности определения расчетных зависимостей приводят к достаточно широкому размытию расчетного профиля и как следствие пересечения n- и p- областей (рис.1).

Коэффициент диффузии при бесконечной температуре – предэкспоненциальная константа, обусловленная вероятностью перехода примесного атома, определяется в диапазоне от 3 [4] до 20 см<sup>2</sup>/с [7]. Изменение в пределах одного порядка объясняется различными условиями проведения диффузии и

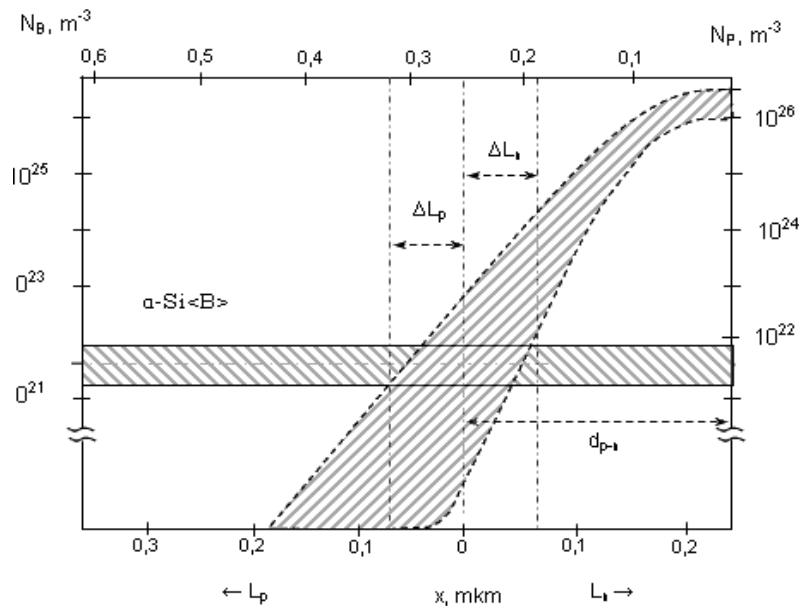


Рис. 1 – Размытие профиля диффузии и уровня начального легирования для мелкозалегающего  $p$ - $n$  перехода

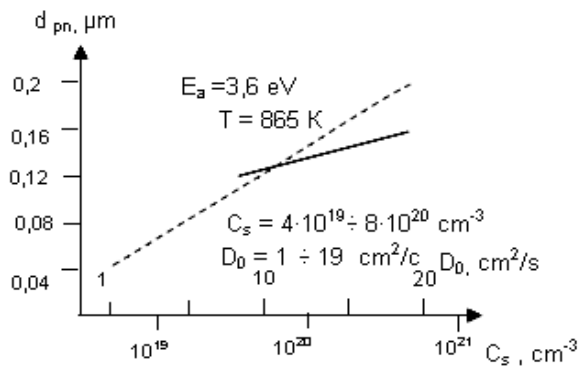


Рис. 2 – Влияние диффузии диффузионных констант на глубину залегания границы раздела  $p$ - $n$ -перехода как функция от изменения: пунктирная линия – коэффициент диффузии при бесконечной температуры, сплошная линия – предел растворимости фосфора в кремнии

начальным состоянием кристалла, что в свою очередь дает отклонение глубины залегания в пределах 80%. Как пример расчёта, на рисунке 2 показано изменение глубины залегания в пределах от 0,04 мкм до 0,2 мкм при проведении диффузии фосфора в кристалле кремния при температуре 865 °С и энергии активации 3,6 эВ.

Энергия активации  $E_a$ , в еще большей степени влияющая на изменение коэффициента диффузии, даже при 5% отклонения от среднестатистической величины [4, 8], дает отклонение глубины залегания потенциального барьера в сотни нанометров. Например, при изменении энергии активации от 3,4 до 3,6 эВ глубина увеличивается на 200 нм (рис.3 пунктирная линия). В процентном отношении данное изменение составляет 60% от общей глубины перехода. Аналогичным образом высокая погрешность нахождения геометрии перехода вводится неточностью выбора и поддержания температурного режима (рис. 3, сплошная линия). При изменении выбора рабочей температуры в пределах от 800 до 900 °С расположение перехода, изменяясь от 50 нм до 0,2 мкм, давая 60% девиацию расположения границы раздела.

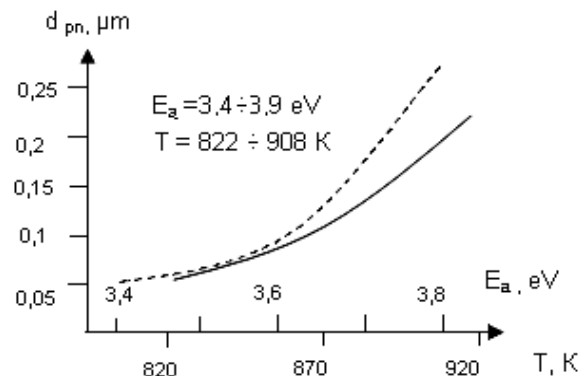


Рис. 3 – Изменение глубины залегания границы раздела между  $p$ - и  $n$ -областями в зависимости от определения расчетных констант: пунктирная линия – как функции от трансформации энергии активации; сплошная линия – при изменении рабочей температуры

Менее чувствительна точность к определению начальной концентрации фосфора в фосфоросиликатном стекле  $C_s$ , численное значение, которой зависит от концентрации вакансий и энергий связей основных и примесных атомов [8, 9, 10]. Связь данного параметра с проведение окислительного процесса достаточно сложна [11, 12], в силу чего численные значения колеблются в пределах  $10^{19}$ - $10^{20}$  см<sup>-3</sup>. В этих пределах глубина залегания барьера лежит в пределах 12% и составляет десятки нанометров (рис.2).

### 3. ОБЩЕЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДА

Приведенные выше неопределенности и несимметричность в еще большей степени усложняют расчеты распределения заряда  $p$ - $n$  перехода и размеров области объемного заряда, требующая специальных модельных подходов [13].

Для точного определения залегания  $p$ - $n$  перехода и геометрии области объемного заряда необходимо решить одномерное уравнение Пуассона [2, 4, 14]:

$$\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = -\frac{\rho_{\Sigma}(x)}{\varepsilon_r \varepsilon_0}, \quad (1)$$

с суммарной плотностью стационарных и подвижных зарядов:

$$\rho_{\Sigma}(x) = \rho_s^+(x) + \rho_m^+(x) + \rho_s^-(x) + \rho_m^-(x). \quad (2)$$

При этом в каждой из областей приповерхностного перехода имеются как положительные стационарный  $\rho_s^+$  и подвижный  $\rho_m^+$ , так и отрицательные стационарный  $\rho_s^-$  и подвижный  $\rho_m^-$  заряды, образованные донорной  $N_D$  и акцепторной  $N_A$  примесями с соответствующими основными  $n_n$ ,  $p_p$ , и неосновными  $p_n$ ,  $n_p$  электронами и дырками. При условии полной ионизации примесных атомов и перекомпенсации базовой примеси равенство (2) можно заменить на два:

$$\begin{aligned} \rho_n(x) &= \rho_n^+(x) + \rho_n^-(x), \text{ для } 0 < x < L_n \\ u \\ \rho_p(x) &= \rho_p^+(x) + \rho_p^-(x), \text{ для } 0 < x < L_p \end{aligned} \quad (3)$$

соответственно для n и p области объемного заряда. Полученное распределение примесных атомов дает асимметричную зависимость плотности стационарного и подвижного зарядов фотогальванического элемента (рис. 3).

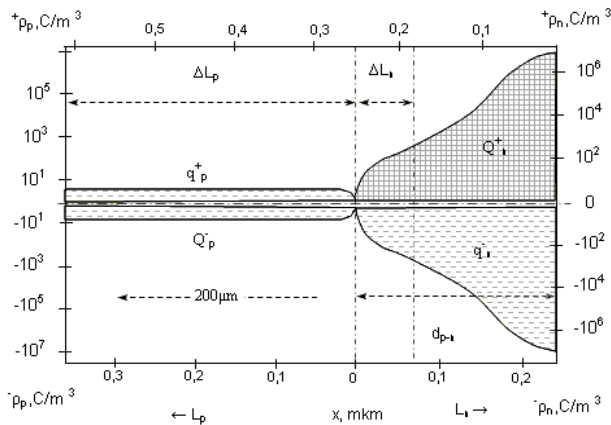


Рис. 4 – Зависимости плотности распределения стационарного и подвижного заряда по глубине приповерхностной области

Здесь положительный стационарный заряд будет определяться разностью донорной и акцепторной примесей при  $0 < x < L_n$ :

$$\rho_n^+(x) = e \cdot (N_d(x) + N_a(x)) \quad (4)$$

А принимая во внимание, что  $N_a = \text{const}$ , равенство (4) можно определить как:

$$\rho_n^+(x) = e \cdot \left( C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} - N_a \right). \quad (5)$$

При переходе металлургического перехода при  $0 < x < L_p$ , когда  $N_a > N_d$ , отрицательный стационарный заряд удобно представить как:

$$\rho_p^-(x) = e \cdot \left( N_a - C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (6)$$

Приведенный выше анализ учета девиаций параметров выражений (5) и (6), приводит 50 % размытию области объемного заряда получаемой при интегрировании плотности распределения (рис. 4).

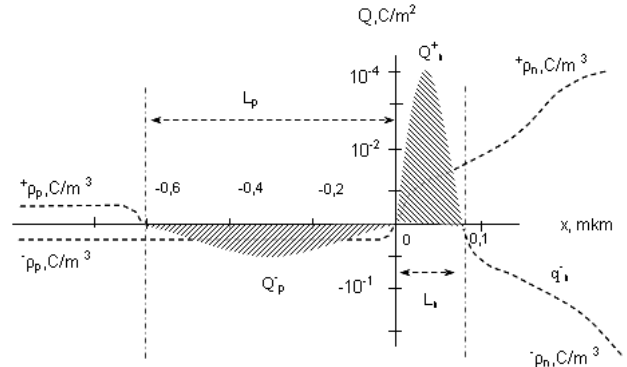


Рис. 5 – Распределение некомпенсированного заряда в области объемного заряда на нормированного на единицу площади фотогальванического перехода

#### 4. ВЫВОДЫ

Для построения мелкозалегающего перехода с глубинами в несколько сотен нанометров необходимо четко просчитывать профиль диффундирующей примеси, профиль которого и определяет рабочие параметры получения фотогальванического элемента. При этом на точность расчета профиля распределения влияют точности определения диффузионных и профильных констант, а также режимов задания технологических процессов.

Коэффициент диффузии, при бесконечной температуре, определяется в диапазоне от 3 до 20 см²/с, что дает отклонение глубины залегания в пределах 80% и как показано изменение глубины залегания в пределах от 0,04 мкм до 0,2 мкм при проведении диффузии фосфора в кристалл кремния при температуре 865 °C и энергии активации 3,6 эВ.

Энергия активации  $E_a$ , в еще большей степени влияющая на изменение коэффициента диффузии, даже при 5% отклонения от среднестатистической величины дает отклонение глубины залегания потенциального барьера в сотни нанометров, при изменении энергии активации от 3,4 до 3,6 эВ глубина увеличивается на 200 нм. В процентном отношении данное изменение составляет 60% от общей глубины перехода.

При изменении выбора рабочей температуры в пределах от 800 до 900 °C расположение перехода, изменяясь от 50 нм до 0,2 мкм, давая 60% девиацию расположения границы раздела.

Менее чувствительна точность к определению начальной концентрации фосфора в фосфоросиликатном стекле  $C_s$ , численные значения колеблются в пределах  $10^{19} - 10^{20}$  см⁻³. В этих пределах глубина залегания барьера лежит в пределах 12 % и составляет десятки нанометров.

Для расчета объемного заряда мелкозалегающего перехода, при условии полной ионизации примесных атомов и перекомпенсации базовой примеси, плотность заряда можно разбить на составляющие и провести интегрирование по двум областям

Приведенный выше анализ учета девиаций параметров выражений (5) и (6), приводит 50 % размытию области объемного заряда получаемой при интегрировании плотности распределения.

## The Asymmetry of the Distribution Density Volume Uncompensated Charge at the Metallurgical p-n Junction

A.S. Mazinov<sup>1,2</sup>, A.I. Shevchenko<sup>1</sup>, M.A. Bykov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> National Taurida V.I. Vernadsky University, 4 Vernadsky av., Simferopol 95007, Crimea, Ukraine

<sup>2</sup> Crimean Scientific Center of NAS and MES, 2 Vernadsky av., Simferopol 95007, Crimea, Ukraine

The features of the formation of shallow junction and its calculation for a solar cell based on single-crystal silicon with front boron were considered. The ambiguity of the calculated profiles recompensating impurity, which is dependent on the accuracy of the constants of diffusion equations, was shown.

**Keywords:** Shallow *p-n* junction, Doping profile of the crystal, Diffusion activation energy for diffusion, Density of the charge distribution, Uncompensated charge *p-n* junction.

## Асиметричність щільності розподілу об'ємного некомпенсованого заряду на кордоні металургійного p-n переходу

А.С. Мазінов<sup>1,2</sup>, А.І. Шевченко<sup>1</sup>, М.О. Биков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Таврійський національний університет ім. В.І. Вернадського, просп. Академіка Вернадського, 4, Сімферополь, Крим 95007, Україна

<sup>2</sup> Кримський науковий центр НАН і МОН, просп. Академіка Вернадського, 2, Сімферополь, 95007, Україна

У роботі розглянуто особливості формування мілкозалегаючого переходу і його розрахунку для створення фотогальванічного елемента на основі монокристалічного кремнію з фронтальним легуванням бором. Показана неоднозначність розрахункових профілів перекомпенсуючої домішки, яка залежить від точності визначення констант дифузійних рівнянь.

**Ключові слова:** Мілкозалегаючий *p-n* перехід, Профіль легування кристала, Коефіцієнт дифузії, Енергія активації дифузії, Щільність розподілу заряду, Нескомпенсований заряд *p-n* переходу.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Solar Cells: Materials, Manufacture and Operation* (Ed. T. Markvart, L. Castafier) (Elsevier: 2005).
2. *Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. Последние достижения* (Пер. с англ. / Под ред. Д. Миллера). (Москва: Радио и связь: 1989).
3. А.Н. Бубенников, *Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем: Учеб. пособие для спец. Физика и технология материалов и компонентов электронной техники* (Москва: Высшая школа: 1989).
4. К. Пирс, А. Адамс, Л. Кац, Дж. Цай, *Технология СВИС. Кн.1* (Пер. с англ./ Под ред С. Зи) (Москва: Мир: 1986).
5. З.Ю. Готра, *Справочник по технологии микроэлектронных устройств* (Львов: Каменяр: 1986).
6. Б.И. Болтакс, *Диффузия в полупроводниках* (Москва: Физмат-гиз: 1961).
7. А.П. Бабичев, *Физические величины. Справочник* (Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова) (Москва: Энергоатомиздат: 1991).
8. А.С. Березин, *Технология и конструирование интегральных микросхем* (Москва: Радио и связь: 1992).
9. С. Зи, *Физика полупроводниковых приборов. Кн. 1* (Пер. с англ./ С. Зи) (Москва: Мир: 1984).
10. З.Ю. Готра, *Технология микроэлектронных устройств: Справочник* (Москва: Радио и связь: 1991).
11. О.В. Александров, Н.Н. Афонин, *ФТП 39 № 6, 647* (2005) (O.V. Aleksandrov, N.N. Afonin, *Semiconductors* **39**, 615 (2005)).
12. Л.С. Палатник, В.К. Сорокин, *Материаловедение в микроэлектронике* (Москва: Энергия: 1977).
13. D. Redfield, *Appl. Phys. Lett.* **35**, 182 (1979).
14. Л. Росадо, *Физическая электроника и микроэлектроника* (Пер. с испан. С.И. Баскакова / Под ред. В.А. Терехова) (Москва: Высшая школа: 1991).